



E0592

### **ESTUDOS DE EQUILÍBRIOS CONFORMACIONAIS ATRAVÉS DAS ESPECTROSCOPIAS DE RMN E IV E CÁLCULOS TEÓRICOS**

Gabriela Fantinato Pereira (Bolsista IC CNPq) e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Em 1953 foi relatada a existência de interações transanulares no estado fundamental entre a carbonila e o nitrogênio diametralmente opostos em algumas moléculas complexas de alcalóides. Porém somente no período de 1954-1957 foi feito um estudo sistemático dessas interações em compostos cíclicos mais simples. O presente trabalho relata um primeiro estudo dessas interações através de cálculos teóricos em aminocetonas e aminoaciloínas cíclicas. Para obtenção de dados experimentais está sendo realizada a síntese de um composto modelo, 1-isopropil-1-aza-ciclononan-5-ol-6-ona, partindo-se da  $\gamma$ -butirolactona para gerar o 4-hidroxibutirato de etila, seguida da substituição do grupo hidroxila por iodo para formar o 4-iodobutirato de etila. Este com isopropilamina dará origem ao  $\gamma,\gamma'$ -isopropilimino-bis-butirato de dietila, o qual por reação intramolecular fornecerá o 1-isopropil-1-azaciclononan-5-ol-6-ona. Paralelamente, estão sendo realizados cálculos teóricos para o composto modelo e para os demais compostos, utilizando o programa GAUSSIAN 03 em nível B3LYP, empregando o conjunto de bases aug-cc-pVDZ. Os cálculos de frequência para as aminoaciloínas cíclicas apresentaram menor frequência da carbonila para os compostos nos quais os substituintes ligados ao nitrogênio eram menores, demonstrando maior interação transanular, em concordância com os dados experimentais da literatura.

RMN - Cálculos teóricos - Análise conformacional